ДӘРІС 7. ГРАФЕН ЖӘНЕ ГРАФЕН НЕГІЗДІ КӨМІРТЕКТІ СОРБЕНТТЕР

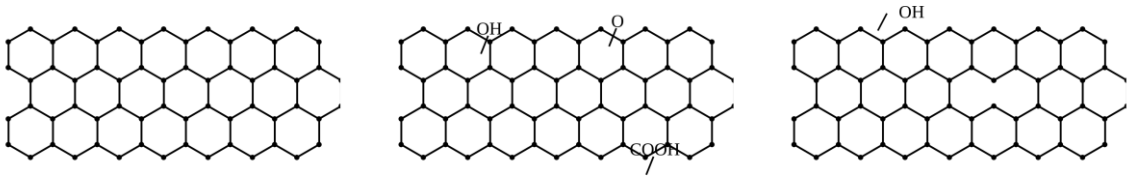
Дәрістің мақсаты. Графен мен оның туындыларының құрылымдық айырмашылықтарын, алыну әдістерін, беткі функционалдық топтарының адсорбциядағы рөлін және су тазарту үшін қолданылуын түсіндіру.

1. Графен және оның туындылары туралы жалпы түсінік

Графен — sp^2-гибридтелген көміртек атомдары бір атомдық қалыңдықтағы алтыбұрышты тор түзетін екіөлшемді материал. Электрондардың делокализацияланған π-жүйесі графеннің электрөткізгіштігі мен ароматты молекулаларға қатысты беткі әрекеттесуін анықтайды. Идеал жеке қабатты графеннің есептік меншікті беті шамамен 2630 м²/г, алайда нақты ұнтақтарда қабаттардың қайта жиналуы қолжетімді бетті едәуір азайтады [1, 2].

Графен оксиді (GO). Графеннің оттекті туындысы; жазықтығында эпоксид және гидроксил, ал шеткі бөліктерінде карбоксил және басқа оттекті топтар кездеседі. Бұл топтар GO-ның суланғыштығын және иондармен байланысу қабілетін арттыра алады. Оттекті топтардың үлесі мен орналасуы синтез жағдайына тәуелді [1, 3].

Қалпына келтірілген графен оксиді (rGO). GO-ны химиялық немесе термиялық тотықсыздандыру арқылы алынатын материал. Оның кейбір оттекті топтары жойылып, sp^2-аймақтары ішінара қалпына келеді; сонымен бірге қалдық топтар мен құрылымдық ақаулар сақталуы мүмкін.



1-сурет. Графен (сол жақта), графен оксиді (ортада) және қалпына келтірілген графен оксидінің (оң жақта) шартты құрылымдары. Масштаб сақталмаған.

2. Графен негізді сорбенттердің негізгі түрлері

Материал	Құрылымдық ерекшелігі	Сорбциялық маңызы
Графен	Оттекті топтары аз π-жүйелі қабат	Ароматты органикалық заттармен әрекеттесу
GO	–OH, –COOH, эпоксид топтары бар қабат	Металл иондарымен беттік байланысу
rGO	Оттек мөлшері азайған, ақаулары бар қабат	Органикалық адсорбаттармен әрекеттесу
3D композит	Қабаттар кеңістіктік қаңқаға біріктірілген	Кеуектерге қолжетімділік пен бөліп алуды жақсарту

Графен парағының өзі міндетті түрде микрокеуекті сорбент емес. Микро- және мезокеуектер қабаттарды кеңістікте біріктіру, шаблондау немесе активтендіру кезінде пайда болуы мүмкін; олардың нақты өлшемі тәжірибеде анықталуы тиіс [4].

3. Графен негізді сорбенттерді алу және түрлендіру

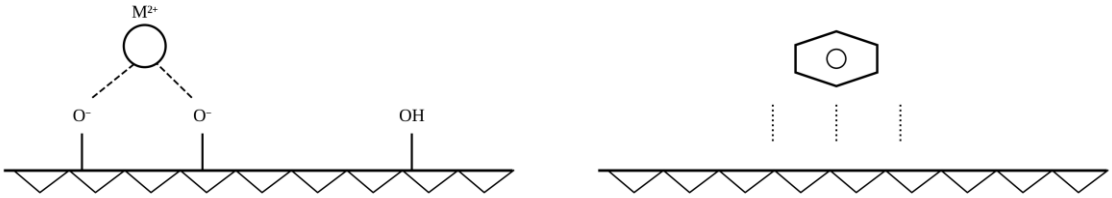
Графенді механикалық қабаттарға ажырату, сұйық ортада эксфолиациялау немесе химиялық бу фазасынан тұндыру арқылы алуға болады. GO алу барысында графитті тотықтырып, түзілген қабаттарды ажыратады. Кейін GO-ны химиялық не термиялық өңдеп rGO алады. Тотықсыздандыру дәрежесі артқанда электрөткізгіштік өзгергенімен, иондарды байланыстыратын оттекті орталықтар азаюы мүмкін [1, 3].

Сорбентті функционалдандыру үшін амин, карбоксил немесе күкіртті топтарды енгізу, полимермен не магнитті оксидтермен біріктіру тәсілдері қолданылады. Мысалы, аминді топтар кейбір металл иондарымен координациялық байланыс түзе алады. Магнитті бөлшектер сорбентті ерітіндіден бөліп алуды жеңілдетуі мүмкін, бірақ композитте магнитті емес беттің азаюы да ескеріледі.

4. Адсорбцияның негізгі механизмдері

Металл иондары. Pb^{2+}, Cu^{2+} немесе Cd^{2+} сияқты катиондар GO бетінің карбоксилат және басқа оттекті топтарымен кешен түзуі, электростатикалық тартылысқа не ион алмасуға қатысуы мүмкін. Әр жүйеде негізгі механизм ластағыштың химиялық түріне, беттік зарядқа және pH-қа тәуелді; pH жоғарылағанда металл гидроксидінің тұнуын адсорбциядан ажырату қажет [3].

Органикалық ластағыштар. Ароматты бояғыштар мен фенолдардың сорбциясына π–π әрекеттесу, сутектік байланыс және гидрофобтық тартылыс үлес қоса алады. GO-дағы оттекті топтар сутектік байланыс орталықтарын берсе, rGO-дағы қалпына келген графиттік аймақтар ароматты адсорбаттармен әрекеттесе алады.



2-сурет. GO бетіндегі оттекті топтардың металл катионымен байланысуы (сол жақта) және ароматты молекуланың π–π әрекеттесуі (оң жақта): шартты үлгі.

5. Адсорбцияға әсер ететін негізгі факторлар

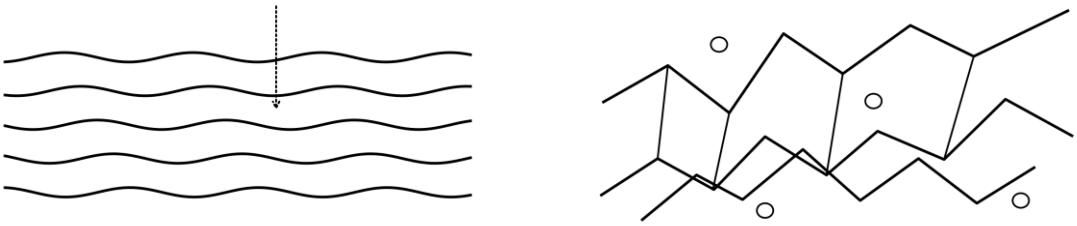
Параметр	Әсер ету себебі	Бақыланатын көрсеткіш
pH	Топтардың протондануы және ион түрлері өзгереді	Соңғы pH, тұнба болуы
Контакт уақыты	Диффузия мен тепе-теңдікке жақындау жүреді	q_t–t кинетикасы
Сорбент дозасы	Жалпы белсенді орталық саны өзгереді	R (%) және q_e (мг/г)
Тұздар мен қоспалар	Бәсекелі адсорбция және экрандау болады	Таңдамалылық, нақты судағы тиімділік

Температураның әсері әмбебап емес: диффузия үдеуі мүмкін, бірақ тепе-теңдік сыйымдылығы адсорбция энтальпиясына және басқа жағдайларға қарай өседі немесе кемиді. Әртүрлі сорбент нәтижелерін тек бірдей тәжірибелік жағдайда салыстыру орынды.

6. Кеуектілік және графен қабаттарының кеңістіктік орналасуы

GO және rGO парақтары кептіру кезінде қайта қабаттасып, адсорбаттың белсенді бетке өтуін шектей алады. Бұл мәселені азайту үшін үшөлшемді аэрогельдер, гидрогельдер, кеуекті мембраналар және басқа тірекпен композиттер жасалады. Өзара жалғасқан қуыстар диффузияны жеңілдетуі мүмкін, бірақ кеуек пішіні мен көлемі синтезге тәуелді [2, 3].

IUPAC жіктемесі бойынша микрокеуектердің ені 2 нм-ден аспайды, мезокеуектер — шамамен 2–50 нм, ал макрокеуектер — 50 нм-ден үлкен. Кеуектілік пен меншікті бет туралы қорытынды жасау үшін газ адсорбциясының деректері және тиісті талдау модельдері қажет [4].



3-сурет. Қабаттардың тығыз қайта жиналуы (сол жақта) және қолжетімді қуыстары бар үшөлшемді графен қаңқасы (оң жақта). Сызба шартты, масштаб сақталмаған.

7. Сорбциялық тиімділікті бағалау және зерттеу әдістері

Ерітіндіде көлем өзгермесе, адсорбциялық сыйымдылық (q_e) пен бөлу дәрежесі (R) бастапқы және тепе-теңдік концентрациялары арқылы есептеледі:

$q_e = (C_0 - C_e) \cdot V / m$; $R = (C_0 - C_e) / C_0 \cdot 100\ \%$.

Мұндағы C_0 және C_e — концентрациялар (мг/л), V — ерітінді көлемі (л), m — құрғақ сорбент массасы (г). Мысалы, 100 мл ерітіндіде C_0 = 40 мг/л, C_e = 10 мг/л және m = 0,050 г болса, q_e = 60 мг/г, R = 75 %. Бұл — есептеуді түсіндіретін шартты мысал.

Құрылымды SEM/TEM арқылы, оттекті топтарды FTIR және XPS арқылы, ақауларды Raman спектроскопиясымен, қабатталуды XRD арқылы және қолжетімді меншікті бетті газ адсорбциясы арқылы бағалайды. Нақты әдістер зерттеу мақсаты мен аспаптардың қолжетімділігіне байланысты таңдалады.

8. Қолданылуы, шектеулері және қорытынды

Графен негізді сорбенттер металл иондарын, боyғыштарды және органикалық қоспаларды судан жою үшін зерттеледі. Практикалық шектеулері: қабаттардың агрегациясы, нанобөлшектерді судан толық бөліп алу, регенерация кезіндегі қасиеттердің өзгеруі және өндірістік құн. Тиімді сорбент таңдауда сыйымдылықпен қатар селективтілік, қауіпсіздік пен көпциклді тұрақтылық бағаланады.

Қорытынды. Графеннің π-жүйесі, GO-ның оттекті топтары және 3D композиттердің қолжетімді кеуектері әртүрлі адсорбциялық міндеттерді шешуге мүмкіндік береді. Сорбция тиімділігі материал құрылымымен қатар ерітіндінің химиялық құрамына тәуелді.

Бақылау сұрақтары

1. Графен, GO және rGO несімен ерекшеленеді? 2. GO металл иондарын қандай механизмдермен ұстайды? 3. Қабаттардың қайта жиналуы неліктен тиімсіз? 4. q_e және R қалай анықталады? 5. Графен негізді сорбенттерді қолданудың негізгі шектеулері қандай?

Ұсынылатын әдебиеттер

1. Dreyer D. R. et al. The chemistry of graphene oxide. Chem. Soc. Rev., 2010, 39, 228–240. 2. The characterisation of commercial 2D carbons. Mater. Adv., 2022. DOI: 10.1039/D1MA01023A. 3. Fan Y. et al. J. Ind. Eng. Chem., 2026. DOI: 10.1016/j.jiec.2026.08.040. 4. IUPAC Gold Book: Mesopore. DOI: 10.1351/goldbook.M03853.